8X

УДК 621.384.8

Т.З. Хабурзания
Санкт-Петербургский государственный политехнический университет, Россия
z_tim@mail.ru

Нейросетевое моделирование при решении обратных задач обработки аналитической информации

Обсуждается подход к использованию нейронных сетей в качестве конкурирующей вычислительной технологии при обработке аналитической информации. Разработана общая функциональная схема и алгоритм преобразования аналитической информации в рамках принципа конкуренции. Основное внимание уделяется выбору топологии нейронной сети и ее структурному и параметрическому синтезу.

Введение

Аналитическое приборостроение является интенсивно развивающейся областью измерительной техники, предназначенной для исследования состава и свойств веществ. Развитие этого направления идет по пути улучшения характеристик аналитических приборов и новых методов анализа результатов измерений. Среди задач аналитического приборостроения следует выделить сжатие диапазона аналитической информации, функциональное преобразование, фильтрация, детектирование и разделение наложенных аналитических сигналов, а также их коррекция. Многие из этих задач относятся к обработке сигналов при использовании хромато-масс-спектрометров – приборов для исследования характеристик вещества [1-21].

Совершенствование вычислительных технологий обработки измерительной информации для сигналов сложной формы связано с развитием методов искусственного интеллекта. Перспективным подходом при решении таких задач является применение искусственных нейронных сетей. Реализация нейросетевого базиса для решения задач аналитического приборостроения обусловлена особенностью нейронных сетей к восприятию, обработке и запоминанию информации. Этому способствует разработка новых методов построения и обучения нейронных сетей [5-7]. В работе синтезирован алгоритм функционирования нейронной сети, реализующий метод обработки сложных сигналов. В основу метода положен критерий, минимизирующий остаточную мощность сигнала, полученного после выделения полезного сигнала на фоне шумовых возмущений. Практический интерес также представляет задача выявления скрытых закономерностей сигнала. Для решения этих задач в диссертации используются радиально-базисные нейронные сети (RBF-сети) [5], [7], [16], [18], [20].

Задача восстановления входного сигнала получила название *обратной задачи*, которая состоит в решении интегрального уравнения относительно сигнала, действующего на входе измерительного канала. Особенностью обратной задачи является нарушение непрерывности оператора преобразования измерительной информации в измерительном канале. В результате при реализации обратного оператора даже малые погрешности измерений приводят к нарушению регулярности решения. Это свойство обратной задачи свидетельствует о ее некорректности и необходимости применения специальных алгоритмов решения в виде модификации метода регуляризации А.Н. Тихонова [17].

Принцип конкуренции при реализации задачи повышения эффективности обработки аналитической информации

Рассмотрим концептуальную модель и процедуры обработки аналитической информации в рамках принципа конкуренции. Приведем схему алгоритма сравнительного анализа альтернативных решений при обработке данных измерений аналитических сигналов с использованием традиционных и нейросетевых методов.

Реакция реального аналитического прибора на какой-либо компонент анализируемого вещества представляет собой функцию $y_u(x)$ от независимого аргумента x. Эта функция определяется механизмом функционирования прибора. Реакция прибора A(x) зависит также и от характеристик преобразователя «свойство – выходной сигнал» или регистрирующего устройства (детектора по теплопроводности в термическом сигнале и хроматографии, диспергирующего элемента в спектроскопии).

Таким образом, на выходе реального аналитического прибора наблюдается аналитический сигнал $y_p(x)$, обусловленный реакцией идеального прибора $y_u(x)$ и функцией $A(x)$. Обычно эти функции связаны друг с другом через формулу свертки [13-15]:

$$\int_0^{\infty} y_p(x) = y_u(x_1)A(x-x_1)x_1 \tag{1}$$

и для большинства аналитических приборов имеют конечную площадь, т.е. имеют вид пика (например, Гауссова), характеризующегося интенсивностью и шириной.

Если ширина функции $y_u(x)$ много меньше ширины функции $A(x)$, то наблюдаемый аналитический сигнал описывается выражением:

$$y_p(x) \approx A(x-x_1)\int_0^{\infty} y_u(x_1)dx_1 = K_1 A(x-x_1)\,, \tag{2}$$

где K_1 – константа. Реальный сигнал на выходе прибора в этом случае соответствует функции прибора. Если же ширина функции $y_u(x)$ много больше ширины функции $A(x)$, то наблюдаемый сигнал описывается выражением:

$$y_p(x) \approx y_u(x)\int_0^{\infty} A(x-x_1)\,dx_1 = K_2 y_u(x_1)\,, \tag{3}$$

где K_2 – константа, а реальный сигнал соответствует сигналу на выходе идеального прибора.

При сравнимой ширине функции и реакции прибора возникает погрешность, определяемая видом функции $A(x)$. Большая часть поступающих на вход аналитических систем сигналов нестандартны и требуют предварительной обработки по устранению этой погрешности. Это достигается с помощью специально разработанных алгоритмов обработки аналитической информации, которые реализуются с помощью современных вычислительных средств, встраиваемых в аналитический прибор. В результате такой интеграции создаются аналитические комплексы, имеющие достаточный объем памяти (особенно необходимый в хроматографическом эксперименте) и способные работать в режиме реального времени (в такте эксперимента).

Рассмотрим подход к разработке аналитического комплекса, использующего в качестве алгоритмов обработки информации конкурирующие вычислительные технологии, основанные на традиционных методах и нейросетевых алгоритмах. Одной из центральных задач использования этого подхода является формирование ядра системы, включающего в себя предметную область, базу знаний и базу данных. Для со-

здания этой совокупности формируется концептуальная модель аналитического комплекса (рис. 1), ориентированная на решение обратных задач измерительной техники с целью эффективного улучшения разрешающей способности применяемых технических средств. В функциональном аспекте такая модель включает следующие компоненты [12]:

$$S_F = \langle X, Y, A, P_F, \rangle \qquad (4)$$

$S_F = \{S_{F1},\ldots, S_{FN}\}$ – совокупность функциональных элементов, определяющих интегрированный комплекс; $X = X_j\left(j = \overline{1,n}\right)$ и $Y = Y_i\left(i = \overline{1,m}\right)$ – вектор-множества входных и выходных сигналов; A: $X \rightarrow Y$ – оператор, определяющий процесс функционирования системы S_F; P_F –множество функциональных параметров.

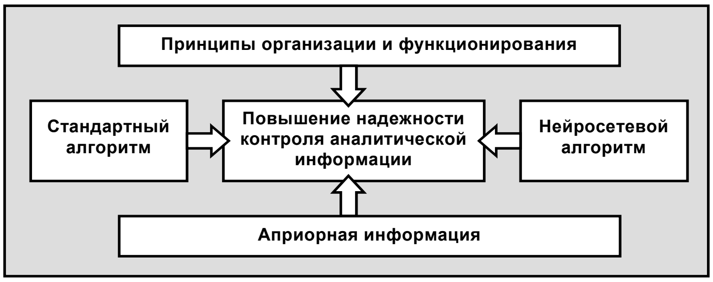


Рисунок 1 – Концептуальная модель аналитического комплекса

Реализация концептуальной модели осуществляется на основе принципа конкуренции (рис. 2), использование которого позволяет повысить достоверность результатов анализа за счет выбора наиболее предпочтительной вычислительной технологии в зависимости от особенностей исследуемого сигнала [12].

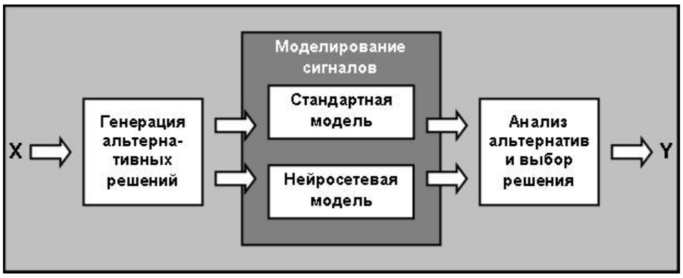


Рисунок 2 – Реализация принципа конкуренции

Концепция конкуренции особенно эффективна в сложных ситуациях при наличии значительных помех и скрытых особенностей сигналов. Как показывают результаты исследований [14], полной редукции к идеальному прибору при решении обратных задач измерительной техники достигнуть не удается из-за неточного знания аппаратурной функции системы измерений или другого физического прибора, наличия погрешности реализации корректирующего устройства (фильтра) и некорректности обратной задачи.

Выбор модели нейронной сети и методов ее обучения

Результаты аналитического обзора состояния вопроса позволили осуществить выбор топологии нейронной сети, обеспечивающей эффективную обработку аналитической информации применительно к задаче хромато-масс-спектрометрического анализа. В процессе рассмотрения имеющихся нейросетевых методов анализа и интерпретации измерительной информации выделены структуры нейронных сетей, реализующие задачи

выделения основных признаков обрабатываемых сигналов. Наибольший интерес для рассматриваемой предметной области представляют радиально-базисные сети (Radial Basis Function) [4], [7], [16], [20].

В отличие от многослойного персептрона, в котором при решении задач классификации исследуемое пространство разбивается гиперплоскостями, в RBF-сетях такое разбиение осуществляется окружностями (в общем случае гиперсферами), которые задаются своим центром и радиусом. Поскольку положение точки в *N*-мерном пространстве определяется числовыми параметрами (весовыми коэффициентами для многослойного персептрона), то по аналогии координаты центров радиальных элементов можно рассматривать как «веса», а радиус как «порог».

Рассмотрим общую характеристику RBF-сетей на основании работ [7], [16], [20]. Математическая модель формального нейрона в RBF-сети имеет вид:

$$y = f(net(X,W)), \tag{5}$$

где y – выходной сигнал; f – функция активации; net(X,W) – дискриминантная функция:

$$Net(X,W) = \sum_{i=1}^{N} W_i U_i(X) = WU(X), \tag{6}$$

где *X* – входной вектор; *W* – вектор весовых коэффициентов.

Дискриминантная функция представляет собой скалярное произведение *N*-мерного вектора весовых коэффициентов *W* и вектора U(X), каждая компонента которого является некоторой функцией входного вектора X. Структура вектора U(X) задает свойства нейрона.

В задачах обработки измерительной информации дискриминантная функция *net(X,W)* (6) может представлять собой отрезок многомерного ряда Тейлора степени L. Если степень L = 1, то соответствующий нейрон называется нейроном первого порядка. В противном случае рассматривают нейроны высших порядков [16], [20]. В этом случае коэффициенты разложения отрезка многомерного ряда Тейлора образуют вектор весовых коэффициентов *W* и функция $net_1(X,W)$ нейрона первого порядка имеет вид [16]:

$$Net_1(X,W) = w_0 + \sum_{j=1}^{N} w_j x_j = WU(X), \tag{7}$$

где $W = (w_n, \ldots, w_N)$ – вектор весовых коэффициентов нейрона; $U(X) = (1, x_1, \ldots, x_N)$ – расширенный вектор входа нейрона; x_j – *j*-я компонента *N*-мерного входного вектора *X*.

Для нейрона второго порядка дискриминантная функция равна:

$$Net_2(X,W) = w_0 + \sum_{j=1}^{N} w_j x_j + \sum_{i=1}^{N} \sum_{k=1}^{J} w_{jk} x_j x_k = WU(X), \tag{8}$$

где $W_0, W_1, j = 1,\ldots,N, k = 1,\ldots,J$ – компоненты вектора весовых коэффициентов, а расширенный входной вектор имеет вид:

$$U(X) = (1, x_1, \ldots, x_N, x_1^2, x_2 x_1, \ldots, x_N^2). \tag{9}$$

Компоненты вектора U(x) могут быть более сложными функциями, чем функции, образующие отрезок ряда Тейлора. В частности, довольно распространенной является функция:

$$u_i(X) = f(r_i), \tag{10}$$

где $r_i = ((X - C_i)^T (X - C_i))^{1/2}$ – евклидово расстояние от точки X до заданной точки C. Нейронную сеть, использующую описанные нейроны, называют ИНС радиально базисных функций RBF. Вид базисной функции в этом выражении определяет название сети.

Так, если функция задается выражением

$$f(r_i) = \exp(-r^2/2\sigma^2), \qquad (11)$$

где σ – параметр, определяющий размах базисной функции, такая RBF-сеть называется сетью гауссовых базисных функций.

Топология RBF-сети представлена на рис. 3. Сеть имеет один промежуточный слой, состоящий из радиальных элементов, каждый из которых воспроизводит гиперсферу. Базисные функции нелинейны и нет необходимости выбирать более одного промежуточного слоя. Для моделирования любой функции достаточно взять определенное число радиальных элементов. Обучение промежуточного слоя реализовано по алгоритму объективной классификации.

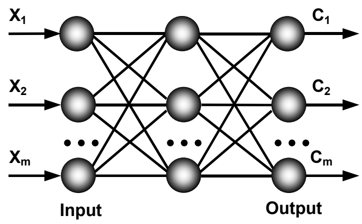


Рисунок 3 – Топология BRF-сети: input, output – входной и выходной слои; $C_1,\ldots,C_m$ – кластеры

Выход сети BRF формируется в результате комбинации выходов скрытых радиальных элементов. Оказывается, что достаточно взять их линейную комбинацию. Поэтому сети BRF имеют выходной слой, состоящий из элементов с линейными функциями активации. Это позволяет не проводить их обучение.

Сети BRF имеют ряд преимуществ, которые могут быть использованы при анализе хромато-масс-спектрометрических сигналов:

– обеспечение моделирования произвольной нелинейной функции с помощью всего одного промежуточного слоя, в результате чего отпадает необходимость решения вопросов о числе слоев нейронной сети;

– возможность полной оптимизации параметров линейной комбинации в выходном слое с помощью хорошо известных методов линейной оптимизации (при обучении отсутствует возможность попадания в локальный минимум).

В результате BRF-сети обучаются значительно быстрее, чем многослойный персептрон. При этом следует иметь в виду, что в промежуточном слое в процессе обучения для радиальных элементов необходимо определять положения их центров и величины отклонений. Проведенный анализ концепций и путей построения RBF-сетей позволил сформулировать последовательность выполнения операций на этапе предварительной обработки информации при подаче на нейронную сеть и пути модернизации имеющихся алгоритмов обучения с учетом особенностей обработки аналитической информации [1], [13-15]. В контексте параметрического синтеза RBF-сети задача проектирования состоит в выборе такого *тестового набора образов* исследуемых сигналов, который позволил бы, с одной стороны, построить аналитическую оценку исходя из структурных характеристик сети, а с другой – реализовать экспериментальную проверку.

Процедуры нейросетевого моделирования охватывают круг задач, связанных с созданием конкурирующей вычислительной технологии формирования различных структур RBF-сетей – сети стандартной конфигурации и нейросетевого ансамбля [12], реализующего эталонные сигналы. При построении ансамбля нейронных сетей учитываются особенности типичных задач обработки аналитической информации [8], которые нашли применение в традиционных алгоритмах (рис. 4).

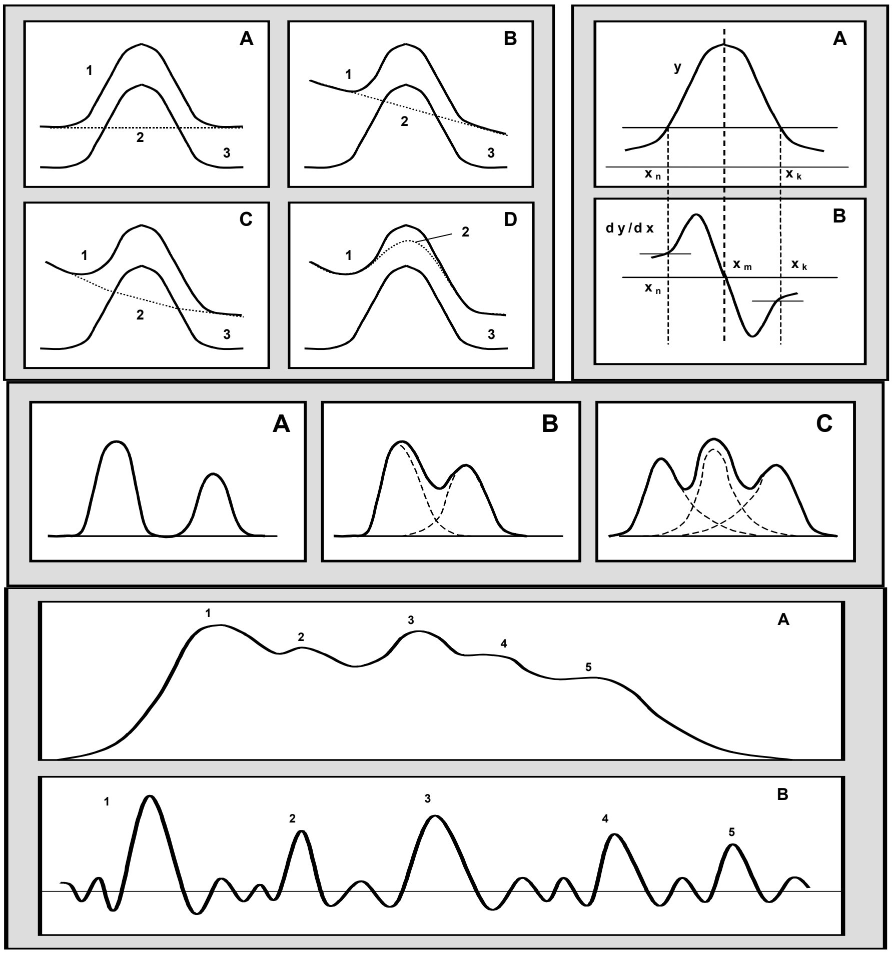


Рисунок 4 – Типичные сигналы, используемые при построении нейросетевого ансамбля: *верхние рисунки*: слева – сигнал с фоном: A – постоянный фон; B – наклонный линейный фон; C – монотонный нелинейный фон; D – фон с выраженным максимумом; 1 – сигнал с фоном; 2 – фон; 3 – сигнал без фона; справа – детектирование аналитического пика: по порогу (A); по производной (B); *средние рисунки*: аналитический спектр с хорошим (A) и плохим (B, C) разделением сигналов; *нижние рисунки:* разделение аналитических пиков: A, B – исходная и преобразованная спектрограммы; 1 – 5 составляющие спектрограммы

Структура программного средства обработки аналитической информации

Рассмотрим структуру программного средства обработки аналитической информации. Выделим задачи обработки информации в процессе функционирования программного средства, логически сгруппированные по уровням, между которыми установлены связи в соответствии с эталонными моделями.

Структурная схема программного средства может быть представлена в виде системы S_F, определяемой элементами:

$$S_M = \langle M_E, C_E, P_M \rangle, \qquad (12)$$

где M_E – множество элементов системы (приборы, алгоритмы, вычислительные средства); C_E – множество, определяющее совокупность связей между элементами; P_M –

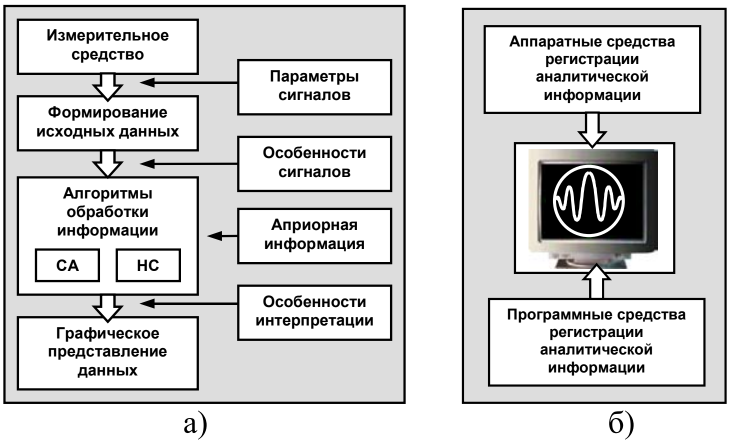
множество параметров, характеризующих физические закономерности и особенности исследуемых сигналов.

Условия формирования системы S_F представляются совокупностью

$$S_W = <G, R, U_R, K_R, E_f> \qquad (13)$$

где G – цели функционирования при реализации задачи R; U_R – принципы и алгоритмы управления процессом хромато-масс-спектрометрии; K_R – качество результата решения задачи; E_G – эффективность, определяющая, какой ценой достигается цель G.

На основе концептуальной модели осуществлен синтез программно-аппаратных средств обработки аналитической информации (рис. 5).



Рисунко 5 – Поток информации (а) и программно-аппаратное средство (б) обработки данных измерений: СА – стандартный алгоритм; НС – нейронная сеть

Полный комплект системы содержит набор аналитических приборов, приборный интерфейс, вычислительное средство на базе ЭВМ стандартной конфигурации и алгоритмы обработки информации с использованием стандартных и нейросетевых моделей.

Вычислительное средство обеспечивает коррекцию искажений, вносимых инерционностью средств измерений в динамическом режиме и позволяет решать следующие задачи:

– модификация решения обратной задачи в условиях априорной неопределенности;

– разработка программного обеспечения синтеза средств восстановления сигналов в аналитических приборах.

Решение этих задач ведется с использованием нейросетевых методов в условиях нестационарности измеряемого процесса и наличия погрешности задания характеристик корректируемого измерительного средства. Обработка информации в рассматриваемом вычислительном средстве осуществляется в режиме реального времени (в темпе эксперимента). Поскольку используемые алгоритмы обработки аналитической информации достаточно громоздки, а число обрабатываемых и контролируемых аналитических сигналов невелико, используется интерфейс системы машинного типа.

На рис. 6 приведена схема интерфейса пользователя при решении задач анализа сигналов в задачах хромато-масс-спектрометрии. Из этого рисунка следует, что взаимодействие пользователя с программной системой осуществляется с помощью интерпретатора, являющегося основным звеном для выполнения функции управления последовательностью обработки измерительной информации. В процессе взаимодействия пользователь имеет возможность управления блоками логического анализа полученного решения с учетом особенностей задачи и априорной информации. В процессе анализа выявляются скрытые закономерности исследуемых сигналов и графическая реализация результатов анализа.

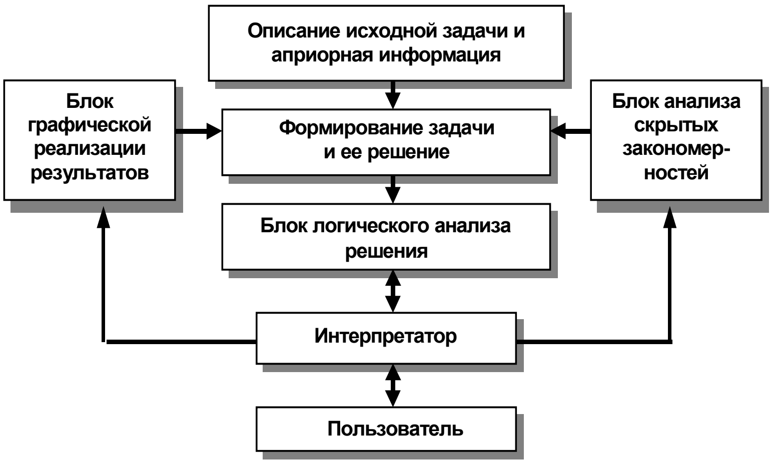


Рисунок 6 – Интерфейс «Пользователь – Аналитическая система»

Для уточнения динамических характеристик аналитических приборов, в частности хромато-масс-спектрометра, используется рекурсивный метод оценки параметров обратной характеристики сигналов, описанный в работах [13-15], позволяющий сократить объем вычислений при функционировании интегрированного комплекса.

Программное обеспечение комплекса разбито на функциональные блоки, каждый из которых решает самостоятельные задачи анализа и интерпретации измерительной информации и находится под управлением системы знаний, отражающей логику его функционирования. Эта программа является составной частью общей программы интерпретатора, обеспечивающего параллельное решение задачи на основе стандартных и нейросетевых алгоритмов, анализ альтернатив и выбор предпочтительной вычислительной технологии обработки данных.

Индикация измерительной информации, результатов анализа, а также текущих сообщений о функционировании программного средства осуществляются с помощью видеотерминала, входящего в состав интегрированного комплекса.

Заключение

Рассмотренные методы и модели формализации знаний при обработке аналитической информации позволяют осуществлять интеграцию программно-аппаратного средства для исследования сложных физических процессов. По результатам исследования можно сделать следующие основные выводы:

1. В качестве конкурирующей вычислительной технологии обработки аналитической информации целесообразно выбирать радиально-базисные нейронные сети, на основе которых можно разрабатывать различные конфигурации в соответствии с поставленными задачами.
2. Выделены основные задачи структурного и параметрического синтеза моделей RBF-сетей для обработки аналитической информации в задачах хромато-масс-спектрометрического анализа.
3. Сформулированы пути реализации системы обработки аналитической информации в задачах хромато-масс-спектрометрического анализа с целью повышения разрешающей способности и фильтрации сигналов с учетом особенностей исследуемых процессов.

Основной задачей математического моделирования сложных аналитических сигналов с помощью нейронных сетей с RBF-архитектурой является нахождение приемлемого компромисса между детализацией и простотой описания. При этом учитывается

главное отличие RBF-сетей от многослойного персептрона, которое состоит в том, что каждый нейрон этой сети реализует локальную аппроксимацию в окрестности некоторой точки, а не различие между значениями функции в полупространствах.

Литература

1. Абденби А. Спектральные преобразования в приспособленном базисе для разделения «наложившихся» пиков и фильтрации масс-спектрометрических сигналов / А. Абденби, А.И. Солодовников, В.В. Манойлов, И.В. Заруцкий // Научное приборостроение. – 2007. – Т. 17, № 1. – С. 103-114.
2. Байдильдин А.Т. Программная система обработки хроматограмм / А.Т. Байдильдин, Н.В. Замятин // Сборник научных трудов III Всероссийской научно-технической конференции «Нейроинформатика – 2001». – Ч. 2. – С. 42-47.
3. Бакушинский А.Б. Итеративные методы решения некорректных задач / А.Б. Бакушинский, А.В. Гончарский. – М. : Наука, 1989.
4. Василенко Г.И. Теория восстановления сигналов. От редукции к идеальному прибору в физике и технике / Василенко Г.И. – М. : Сов. радио, 1979.
5. Галушкин А.И. Теория нейронных сетей / Галушкин А.И. – М. : ИПРЖР, 2000.
6. Дорогов А.Ю. Быстрые нейронные сети / Дорогов А.Ю. – Санкт-Петербург : Изд-во Госуниверситета, 2001.
7. Комарцова Л.Г. Нейрокомпьютеры : учебное пособие для вузов / Л.Г. Комарцова, А.В. Максимов. – М. : Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2002.
8. Куликовский К.Л. Основы построения функционально-параметрического ряда средств обработки аналитической информации / К.Л. Куликовский, П.К. Ланге, В.С. Тихонов // Измерения, контроль, автоматизация. – 1983. – № 2(46). – С. 23-31.
9. Левчук Б.В. Современное состояние хромато-масс-спектрометрии / Б.В. Левчук, Б.Г. Гельман. Б.П. Охотников и др. // Измерения. Контроль, автоматизация: научно-технический сборник обзоров. – М. : ЦЕИИТЭИ приборостроения, 1978. – Вып. 2(14). – С. 3-15.
10. Манойлов В.В. Отбраковка «выбросов» и оценка параметров масс-спектрометрических сигналов для прецизионного изотопного анализа / В.В. Манойлов, И.В.Заруцкий // Научное приборостроение. – 2002. – Т. 12, №3. – С. 67-73.
11. Месарович М. Общая теория систем: математические основы / М. Месарович, Я. Такахара. – М. : Мир, 1978.
12. Нечаев Ю.И. Нейроаппроксимация и нейропрогноз при контроле динамики сложного объекта / Ю.И. Нечаев // Нейрокомпьютеры: разработка, применение. – 2005. – № 10-11. – С. 22-31.
13. Солопченко Г.Н. Некорректные задачи измерительной техники / Г.Н. Солопченко // Измерительная техника. – 1974. – № 1. – С. 51-55.
14. Солопченко Г.Н. Обратные задачи в измерительных процедурах / Г.Н. Солопченко // Измерения, контроль, автоматизация. – 1983. – № 2. – С. 32-46.
15. Солопченко Г.Н. Компенсация динамических погрешностей при неполных сведениях о свойствах прибора и измеряемого сигнала / Г.Н. Солопченко, И.Б. Челпанов // Метрология. – 1979. – № 6. – С. 3-13.
16. Тархов Д.А. Нейронные сети. Модели и алгоритмы / Тархов Д.А. – М. : Радиотехника, 2005.
17. Тихонов А.Н. Методы решения некорректных задач / А.Н. Тихонов, В.Я. Арсенин. – М. : Наука, 1986.
18. Уоссермен Ф. Нейрокомпьютерная техника: теория и практика / Уоссермен Ф. – М. : Мир, 1992.
19. Gu B. classification performance for large data sets: an empirial study / B. Gu, F. Hu, H. Liu // Lecture Notes in Comp. Sci. – 2001. – Vol. 2118. – P. 317-328.
20. Haykin S. Neural networks, a comprehensive foundation / Haykin S. – NY. : Macmillan, 1994.
21. Smith H.C. Bace-Line noise and detection limits in signal-integrating analytical methods / H.C. Smith, H.L. Walg // Chromatographia. – 1975. – Vol. 8, № 2. – P. 311-323.

T.Z. Khaburzaniya

Neural Network Modeling in Solving of Reverse Tasks of the Analytical Information Processing

In the work the approach to neural networks application is discussed as the competitive computing technology in the analytical information processing. The general function chart and algorithm of transformation of the analytical information are developed within the framework of a competition principle. The basic attention is given to a choice of topology of a neural network both its structural and parametrical synthesis.

Статья поступила в редакцию 03.06.2010.